ПМТФ, № 3, 1968

К ВЫЧИСЛЕНИЮ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

А. Г. Фокин, Т. Д. Шермергор

(Москва)

Показано, что теория случайных функций, позволяющая получить разложение эффективного тензора упругих модулей λ^*_{ijkl} по корреляционным функциям, приводит во втором приближении схем Фойгта и Ройсса к значениям, лежащим по одну сторону от λ^*_{ijkl}, а в третьем — дает вилку. Проведенный анализ используется для улучшения хашинских границ упругих модулей в случаях механической смеси изотропных компонентов и поликристаллов кубической структуры.

Расчет эффективных упругих модулей гетерогенных твердых тел может быть проведен двумя методами — разложением в ряд по степеням концентрации одного из компонентов (метод вириального разложения) [1] и разложением по относительной флуктуации упругих модулей [2] (метод корреляционных функций). Учет всех членов ряда должен в обоих случаях приводить к одинаковым результатам, однако, вследствие значительных математических трудностей приходится ограничиваться низшими приближениями. Вириальный метод в первом приближении дает лучшие результаты при малой концентрации одного из компонентов, а метод корреляционных функций — при малой флуктуации упругих модулей и близких концентрациях.

Для обоих методов разработаны способы определения верхней и нижней границ, между которыми находятся истинные значения упругих модулей, причем в методе корреляционных функций для этой цели используются различные схемы усреднения: верхняя граница устанавливается на основе перенормировки уравнения равновесия, а нижняя — с помощью перенормировки уравнения несовместности. Сужение вилки может быть достигнуто посредством учета высших приближений. В пределе ширина вилки должна стремиться к нулю, что означает переход от приближенного значения эффективного тензора упругих модулей к точному, связывающему средние по материалу напряжения и деформации. Ниже показывается, что оба метода перенормировок при суммировании всех членов ряда приводят к одинаковым результатам.

В случае, если распределение тензора упругих модулей является гауссовским, моментные функции нечетного порядка равны нулю, а четного — выражаются через всевозможные комбинации бинарных функций [3]. Однако, в рассматриваемом случае механической смеси нескольких компонентов распределение не является гауссовским, а нечетные моментные функции отличны от нуля. Расщепление корреляционных функций высших порядков возможно и для механических смесей, обладающих детерминированными границами раздела фаз, однако это связано с рядом допущений, упрощающих задачу. Ниже дается вывод моментных функций произвольного порядка, позволяющий сформулировать условия, при которых такое расщепление правомерно. Полученные результаты используются для вычисления точного значения эффективного модуля всестороннего сжатия для среды с однородным модулем сдвига.

1. Для вычисления корреляционных функций высших порядков будем искать вероятность того, что в точке $\mathbf{r}_1$ находится компонент i, в точке $\mathbf{r}_2$ — компонент j и т. д. Обозначим совместную вероятность реализации такого события через $P_{ijk\ldots}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\ldots)$. Найдем дифференциальные уравнения, которым удовлетворяют функции $P_i(\mathbf{r}_1)$, $P_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и т. д. Для этой цели введем условную вероятность $p_{ij}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2)$, которая определяет вероятность встретить в точке $\mathbf{r}_1$ компонент i, если в точке $\mathbf{r}_2$ находится компонент j. Ограничиваясь случаем двухкомпонентной смеси, будем считать, что $i, j = 1,2$. Тогда вероятность $P_i(\mathbf{r} + d\mathbf{r})$ найти компонент i в точке $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ выражается через вероятность $P_j(\mathbf{r})$ нахождения компонента j в точке $\mathbf{r}$ уравнением Смолуховского

$$P_i(\mathbf{r} + d\mathbf{r}) = \Sigma p_{ij}(\mathbf{r} + d\mathbf{r} \,|\, \mathbf{r}) P_j(\mathbf{r}) \qquad (1.1)$$

Примем, что рассматриваемая смесь подчиняется условию

$$p_{ij}(\mathbf{r} + d\mathbf{r} \mid \mathbf{r}) = \delta_{ij} + \mathbf{A}_{ij}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \tag{1.2}$$

где матрица перехода $\mathbf{A}_{ij}(\mathbf{r})$ определяется выражением

$$\mathbf{A}_{ij}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\partial}{\partial \rho} p_{ij}(\rho \mid \mathbf{r})\right]_{\rho=\mathbf{r}} \qquad \left(\sum_i \mathbf{A}_{ij} = 0\right) \tag{1.3}$$

и удовлетворяет условию нормировки, указанному в скобках

В случае изотропной и квазиоднородной среды матрица перехода

$$\mathbf{A}_{ij}(\mathbf{r}) = A_{ij}(0)\frac{\mathbf{r}}{r} = A_{ij}\,\mathbf{n} \tag{1.4}$$

Подставляя равенство (1.2) в уравнение (1.1), получим

$$\nabla P_i(\mathbf{r}) = \sum_j \mathbf{A}_{ij} P_j(\mathbf{r}) \tag{1.5}$$

Решение уравнения (1.5) с учетом условий нормировки и выражения (1.4) имеет вид

$$P_1 = aA_{12} + C_1 \exp(-r/a), \qquad P_2 = aA_{21} + C_2 \exp(-r/a) \tag{1.6}$$

$$a \equiv (A_{12} + A_{21})^{-1}$$

Отсюда, принимая во внимание требование квазиоднородности

$$P_i(\mathbf{r}) = c_i \tag{1.7}$$

находим связь матрицы перехода A_{ij} с концентрациями компонентов

$$aA_{ij} = \begin{Vmatrix} -c_2 & c_1 \\ c_2 & -c_1 \end{Vmatrix} \tag{1.8}$$

Для вычисления совместной вероятности $P_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ воспользуемся уравнением

$$P_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_k p_{ik}(\mathbf{r}_1 \mid \mathbf{r}_3) P_{kj}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2) \tag{1.9}$$

Отсюда, учитывая, что для квазиоднородной среды $P_{kj}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = P_{kj}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, найдем

$$\frac{d}{dr} P_{ij}(r) = \sum_k A_{ik} P_{kj}(r) \tag{1.10}$$

После подстановки в это уравнение явного значения A_{ik} согласно (1.8), получим

$$a\frac{d}{dr} P_{ij}(r) = -P_{ij}(r) + P_i P_j \tag{1.11}$$

Решение уравнения (1.11), удовлетворяющее условию $P_{ij}(0) = c_i \delta_{ij}$, имеет вид

$$P_{ij}(r) = \alpha_{ij} + \beta_{ij}\varphi(r) \tag{1.12}$$

$$\varphi(r) \equiv \exp(-r/a), \quad \alpha_{ij} = c_i c_j, \quad \beta_{ij} = c_i \delta_{ij} - c_i c_j \tag{1.13}$$

Выражение (1.12) дает совместную вероятность, найденную при условии, что переход из исходного состояния в конечное осуществляется перемещением лишь одной точки отрезка $\mathbf{r}$. Пусть теперь переход в новое состояние осуществляется изменением координат как начала, так и конца отрезка, т. е. переход имеет место из состояния $\mathbf{r}_3$, k; $\mathbf{r}_4, l$ в $\mathbf{r}_1$, i; $\mathbf{r}_2$, j.

Такой подход позволяет ввести четырехиндексную матрицу перехода A_{ijkl}, которая будет использована в дальнейшем для вычисления совместной вероятности $P_{ijk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$. Тогда вместо (1.9) будем иметь

$$P_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Sigma\, p_{ijkl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \,|\, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) P_{kl}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \tag{1.14}$$

Для вычисления матрицы перехода из состояния kl, $\mathbf{r}$ в новое состояние ij, $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ разложим $d\mathbf{r}$ на нормальную $d\mathbf{r}_n = dr \cdot \mathbf{n}$ и тангенциальную $d\mathbf{r}_\tau = rd\mathbf{n}$ составляющие. Очевидно, при $d\mathbf{r}_\tau = 0$ переход происходит между точками, лежащими на луче $\mathbf{r} / r = \mathrm{const}$, а при $d\mathbf{r}_n = 0$ — между точками, лежащими на сфере $\mathbf{r} = \mathrm{const}$. Первый из этих переходов изменяет отношение радиуса к масштабу корреляций, тогда как второй оставляет его неизменным.

Имея это в виду, будем считать переходы тождественными, если начальное и конечное состояния имеют одинаковые отношения расстояний к масштабу корреляций. Поскольку поверхность, которую образует вектор масштаба корреляций в случае нетекстурированной среды является сферой, можно положить $d\mathbf{r}_\tau = 0$ и рассматривать лишь переходы, изменяющие абсолютную величину расстояния между точками.

В соответствии с отмеченным, переход из состояния kl, $\mathbf{r}$ в ij, $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ может быть описан матрицей

$$p_{ijkl}(\mathbf{r} + d\mathbf{r} \,|\, \mathbf{r}) = \delta_{ik}\, \delta_{jl} + A_{ijkl}\, dr \tag{1.15}$$

подстановка которой в выражение (2.14) дает

$$\frac{d}{dr} P_{ij} = \sum_{k,\, l} A_{ijkl} P_{kl} \tag{1.16}$$

Из эквивалентности уравнений (1.16) и (1.10) следует, что матрица A_{ijkl} имеет вид

$$aA_{ijkl} = -(\delta_{ik} - P_i)(\delta_{jl} - P_j) \tag{1.17}$$

Соотношение (1.15) накладывает сильные ограничения на структуру механических смесей. Действительно, если в вычислении высших моментных функций ограничиться лишь учетом средних размеров зерен компонентов, связанных с масштабом корреляции правилом механического смешивания, то это эквивалентно игнорированию формы зерен. Последняя может быть учтена, например, набором моментных функций $\langle R(\boldsymbol{\omega})\rangle$, $\langle R(\boldsymbol{\omega}_1) R(\boldsymbol{\omega}_2)\rangle$ и т. д., где R — координата поверхности зерна в системе отсчета, начало которой совмещено с его центром массы, $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{R} / R$, а угловыми скобками обозначена операция усреднения по углам. Кроме того, в таком подходе не учитывается различие между матрицей и включением, поскольку связность областей, занятыми обоими компонентами считается одинаковой. По-видимому, полученное уравнение (1.16) является приемлемым, если концентрации компонентов отличаются не очень сильно и их степени связности близки. Очевидно, метод должен давать лучшие результаты для квазисферических зерен, когда $\langle (R - \langle R\rangle)^2\rangle \ll \langle R\rangle^2$.

2. Перейдем теперь непосредственно к вычислению $P_{ijk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$. В силу изотропности и квазиоднородности среды совместная вероятность $P_{ijk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ может быть представлена в виде $P_{ijk}(r', r'', r''')$, где

$$r' = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|, \quad r'' = |\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|, \quad r''' = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

Будем рассматривать переходы, при которых имеет место условие $r'' = \mathrm{const}$ и $r''' = \mathrm{const}$, однако $r' \neq \mathrm{const}$. Тогда, проводя рассуждения, аналогичные тем, которые использовались при выводе соотношений (1.15) и (1.17), найдем

$$\frac{\partial}{\partial r'} P_{ijk}(r', r', r''') = \sum_{m,\, n} A_{jkmn} P_{imn}(r', r'', r''') \tag{2.1}$$

Подставляя сюда явное значение коэффициентов A_{jkmn} согласно выражению (1.17), получим

$$\frac{\partial}{\partial r'} P_{ijk}(r', r'', r''') = -\frac{1}{a}\{P_{ijk}(r', r'', r''') - P_j P_{ik}(r'') - $$
$$- P_k P_{ij}(r''') + P_i P_j P_k\} \qquad (2.2)$$

Уравнение (2.2) позволяет рассчитать корреляционную функцию третьего порядка тензора упругих модулей. Для нахождения дифференциального уравнения, определяющего явный вид этой функции, введем моментную функцию N-го порядка тензора упругих модулей. Опуская для простоты тензорные индексы $\lambda^i_{pqrs} \equiv \lambda_i$, для моментной функции N-го порядка получим

$$M_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n) = \langle \lambda^{\alpha_1}(\mathbf{r}_1)\lambda^{\alpha_2}(\mathbf{r}_2)\ldots\lambda^{\alpha_n}(\mathbf{r}_n)\rangle =$$
$$= \lambda_i^{\alpha_1}\lambda_j^{\alpha_2}\ldots\lambda_q^{\alpha_n} P_{ij\ldots q}(\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_n) \qquad (2.3)$$

причем $\sum\limits_{k=1}^{n} \alpha_k = N$. Соответственно, для центральной моментной функции N-го порядка будем иметь

$$\mu_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots \mathbf{r}_n) =$$
$$= \langle[\lambda(\mathbf{r}_1) - \langle\lambda(\mathbf{r}_1)\rangle]^{\alpha_1}[\lambda(\mathbf{r}_2) - \langle\lambda(\mathbf{r}_2)\rangle]^{\alpha_2}\ldots[\lambda(\mathbf{r}_n) - \langle\lambda(\mathbf{r}_n)\rangle]^{\alpha_n}\rangle =$$
$$= \sum_{i, j, \ldots, q}[\lambda_i - \langle\lambda(\mathbf{r}_1)\rangle]^{\alpha_1}\ldots[\lambda_q - \langle\lambda(\mathbf{r}_n)\rangle]^{\alpha_n} P_{ij\ldots q}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n) \qquad (2.4)$$

В рассматриваемом случае изотропной квазиоднородной среды из формул (2.3) и (2.4) получим

$$M_N(\mathbf{r}) = <\lambda^N(\mathbf{r})> = \sum \lambda_i^N P_i(\mathbf{r}) = \sum \lambda_i^N c_i$$
$$\mu_1 = 0, \qquad \mu_2 = M_2 - M^2{}_1,$$
$$\mu_3 = M_3 - 3M_1M_2 + 2M^3{}_1$$
$$M_{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = M^2{}_1 + \mu_2 \exp(-r''' / a), \qquad \mu_{11}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mu_2 \exp(-r''' / a)$$
$$M_{111}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum \lambda_i\lambda_j\lambda_k P_{ijk}(r', r'', r''')$$
$$\mu_{111}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = M_{111}(r', r'', r''') - M_1[M_{11}(r') + \qquad (2.5)$$
$$+ M_{11}(r'') + M_{11}(r''')] + 2M^3{}_1$$

Из последнего выражения находим

$$\frac{\partial}{\partial r'}\mu_{111}(r', r'', r''') = \frac{\partial}{\partial r'}M_{111}(r', r'', r''') - M_1\frac{\partial}{\partial r'}M_{11}(r') \qquad (2.6)$$

Производные, входящие в правую часть равенства (2.6), определяются из уравнений (1.11) и (2.2) с учетом (2.3). Это дает

$$\frac{\partial}{\partial r'}M_{11}(r') = -\frac{1}{a}[M_{11}(r') - M_1^2] \qquad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial r'}M_{111}(r', r'', r''') = -\frac{1}{a}\{M_{111}(r', r'', r''') - M_1[M_{11}(r'') + M_{11}(r''')] + M_1^3\} \qquad (2.8)$$

Подставляя (2.7) и (2.8) в уравнение (2.6), получим

$$\frac{\partial}{\partial r'}\mu_{111}(r', r'', r''') = -\frac{1}{a}\mu_{111}(r', r'', r''') \qquad (2.9)$$

Аналогичные уравнения имеют место и при дифференцировании по двум другим переменным. Таким образом, центральная моментная функция $\mu_{111}(r', r'', r''')$ имеет вид

$$\mu_{111}(r', r'', r''') = \mu_{111}(0, 0, 0)\varphi_3(r', r'', r''') \tag{2.10}$$

причем

$$\mu_{111}(0, 0, 0) = \mu_3 \tag{2.11}$$

$$\varphi_3(r', r'', r''') = \varphi(r')\varphi(r'')\varphi(r'''), \qquad \varphi(r) = \exp(-r/a) \tag{2.12}$$

Используя выражения (1.12) и (2.10), легко получить решение уравнения (2.2) для смешанной вероятности $P_{ijk}(r_1, r_2, r_3)$:

$$\begin{aligned} P_{ijk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= c_i c_j c_k + c_i(c_j\delta_{jk} - c_j c_k)\varphi(r') + \\ &+ c_j(c_i\delta_{ik} - c_i c_k)\varphi(r'') + c_k(c_i\delta_{ij} - c_i c_j)\varphi(r''') + \\ &+ \Big[\sum_n c_n\delta_{in}\delta_{jn}\delta_{kn} - c_i c_j\delta_{jk} - c_j c_k\delta_{ik} - c_k c_i\delta_{ij} + 2c_i c_j c_k\Big]\varphi(r')\varphi(r'')\varphi(r''') \end{aligned} \tag{2.13}$$

Найденные выражения для центральных моментных функций (2.10) — (2.12) определяют также корреляционные функции тензоров упругих модулей. Действительно, корреляционная функция второго порядка совпадает с центральным моментом второго порядка, а корреляционная функция третьего порядка $K_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ следующим образом выражается через центральную моментную функцию третьего порядка $\mu_{111}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$

$$K_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \mu_{111}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + 3M^3{}_1 \tag{2.14}$$

Центральные моментные функции высших порядков могут быть получены аналогичным образом. Соответствующий расчет дает

$$\mu_{\underbrace{11\ldots1}_{n}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots \mathbf{r}_n) = \mu_n \prod_{\alpha=1}^{0.5n(n-1)} \varphi(r^\alpha) \tag{2.15}$$

где $\mathbf{r}^\alpha \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, а произведение берется по всем возможным парам разностей $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$.

3. Применим полученные результаты для вычисления эффективного модуля всестороннего сжатия нетекстурированной гетерогенной среды, состоящей из изотропных компонентов. Ограничимся случаем, когда модули сдвига компонентов совпадают.

Используя технику, развитую в работах [3–5], можно провести перенормировку уравнения равновесия

$$L_{il}u_l + f_i = 0, \qquad L_{il} \equiv \nabla_k \lambda_{iklm} \nabla_m \tag{3.1}$$

Здесь и далее по дважды встречающимся индексам предполагается суммирование. Вектор смещения u_l, тензор упругих модулей λ_{iklm} неоднородной среды и, следовательно, оператор L_{il} являются случайными функциями точки. Вводя обратный оператор M_{ln}

$$L_{il}M_{ln} = -\delta_{in} \tag{3.2}$$

а также операторы, обратные регулярным составляющим $\langle L_{il}\rangle$ и $\langle M_{ln}\rangle$

$$L_{il}^*\langle M_{ln}\rangle = -\delta_{in}, \qquad \langle L_{il}\rangle M_{ln}^* = -\delta_{in} \tag{3.3}$$

находим перенормированное уравнение равновесия для регулярной части вектора смещения

$$L_{il}^*\langle u_l\rangle + f_i = 0 \tag{3.4}$$

Здесь скобки $\langle\ \rangle$ используются для обозначения усреднения, причем область усреднения выбирается достаточно большой по сравнению с пространственным масштабом корреляций, но малой по отношению к размерам, на которых существенно меняется регулярная часть функций.

Используя матричную запись, можно получить для оператора L^* следующее выражение:

$$L^* = \langle L \rangle - \Delta L, \qquad \Delta L = \langle L \rangle \frac{Q}{I + Q} \tag{3.5}$$

$$Q \equiv \langle M^* R M^* R \rangle + \langle M^* R M^* R M^* R \rangle + \ldots \tag{3.6}$$

Здесь I — единичная матрица, а через R обозначена случайная составляющая оператора L. Оператор M^* следующим образом связан с тензорной функцией Грина квазиоднородной среды:

$$M_{ij} {}^* f_j = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f_j(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \equiv G_{ij} * f_j \tag{3.7}$$

Из выражений (3.5)—(3.7) найдем

$$\Delta L = \sum_0^\infty \Delta L^{(n)}, \qquad \Delta L^{(n)} = \mp (-1)^n \langle L \rangle Q^{n+1} \tag{3.8}$$

Первые два члена ряда (3.8) имеют вид

$$\Delta L^{(0)} = -\langle RG * R \rangle - \langle RG * RG * R \rangle - \ldots \tag{3.9}$$

$$\Delta L^{(1)} = \langle RG * R \rangle G * \langle RG * R \rangle + 2 \langle RG * R \rangle G * \tag{3.10}$$

$$* \langle RG * RG * R \rangle + \langle RG * RG * R \rangle G * \langle RG * RG * R \rangle + \ldots$$

Проводя перегруппировку членов в двойном ряде (3.8), будем иметь

$$\Delta L = \sum_2^\infty \Delta K^{(n)} \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned} &\Delta K^{(2)} = -\langle RG * R \rangle, \quad \Delta K^{(3)} = -\langle RG * RG * R \rangle \\ &\Delta K^{(4)} = -\langle RG * RG * RG * R \rangle + \langle RG * R \rangle G * \langle RG * R \rangle \\ &\Delta K^{(5)} = -\langle RG * RG * RG * RG * R \rangle + 2 \langle RG * R \rangle G * \langle RG * RG * R \rangle \end{aligned} \tag{3.12}$$

Здесь $\Delta K^{(n)}$ объединяет все слагаемые двойного ряда (3.8), содержащие n раз случайный оператор R.

Проведем вычисление $\Delta K^{(2)}$ и второго слагаемого $\Delta K^{(4)}$. Остальные слагаемые операторов $\Delta K^{(n)}$ могут быть получены аналогичным образом.

Подставляя явные значения операторов R в $\Delta K^{(2)}$, найдем

$$\begin{aligned} -\langle R_{ik} G_{kn} * R_{nl} \rangle \langle u_l \rangle &= -\nabla_j \langle \delta\lambda_{ijkm} \nabla_m G_{kn} * \nabla_p \delta\lambda_{nplq} \nabla_q \rangle \langle u_l \rangle = \\ &= \nabla_j A_{nplq}^{ijkm} \int \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad G_{kn,\, mp}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle u_{l,\, q}(\mathbf{r}') \rangle d\mathbf{r}' \end{aligned} \tag{3.13}$$

Здесь $\delta\lambda_{ijkm} = \lambda_{ijkm} - \langle \lambda_{ijkm} \rangle$ — флуктуирующая часть тензора упругих модулей, $A_{nplq}^{ijkm} \varphi(\mathbf{r})$ — бинарная корреляционная функция, причем функция $\varphi(\mathbf{r})$ определена равенствами (2.5) и (2.12).

Поскольку в рассматриваемом случае флуктуирует лишь модуль всестороннего сжатия K, автокорреляционный тензор упругих модулей имеет вид

$$A_{nplq}^{ijkm} = D_K^{(2)} \delta_{ij} \delta_{km} \delta_{np} \delta_{lq}, \qquad D_K^{(2)} \equiv \langle (\delta K)^2 \rangle \tag{3.14}$$

Таким образом, для вычисления (3.13) необходимо знать свертку $G_{kn,kn}$. Последняя находится с помощью следующей цепочки равенств

$$\begin{aligned} G_{kn,\, kn} &= \frac{1}{8\pi\mu} \left[\frac{2}{r} \delta_{kn} - \frac{3\langle K \rangle + \mu}{3\langle K \rangle + 4\mu} r_{,\, kn} \right]_{,\, kn} = \\ &= \frac{1}{4\pi(\langle K \rangle + {}^4/_3\mu)} \triangle \frac{1}{r} = -\frac{1}{\langle K \rangle + {}^4/_3\mu} \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{3.15}$$

Подставим выражения (3.14) и (3.15) в (3.13). Это дает

$$\triangle K_{il}^{(2)} = \nabla_i \nabla_l D_K^{(2)} (\langle K \rangle + {}^4/_3\mu)^{-1} \tag{3.16}$$

Аналогичный расчет для первых слагаемых операторов $\Delta K^{(n)}$ дает

$$-\langle R_{ik}G_{km} * R_{mp}G_{pq} * \ldots R_{sl}\rangle = (-1)^n \nabla_i\nabla_l D_K^{(n)} (\langle K\rangle + {}^4/_3\mu)^{1-n} \quad (3.17)$$

Здесь n равно числу сомножителей R_{ik} в левой части равенства, а центральные моменты n-го порядка модуля всестороннего сжатия определяются выражениями

$$D_K^{(1)} = 0, \quad D_K^{(2)} = c_1c_2(K_1 - K_2)^2, \ldots, \quad (3.18)$$
$$D_K^{(n)} = c_1c_2[c_2^{n-1} + (-1)^n c_1^{n-1}] \ (K_1 - K_2)^n$$

Перейдем теперь к вычислению второго слагаемого ΔK_1. Используя выражение (3.13), получим

$$\langle R_{ik}G_{kn} * R_{nr}\rangle G_{rs} * \langle R_{su}G_{uv} * R_{vl}\rangle \langle u_l\rangle =$$
$$= \nabla_j A_{nprq}^{ijkm} A_{valb}^{stuw} \iiint \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\varphi(\mathbf{r}''-\mathbf{r}''')\, G_{kn,\,mp}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (3.19)$$
$$G_{rs,\,qt}(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\, G_{uv,\,wa}(\mathbf{r}''-\mathbf{r}''')\,\langle u_{l,\,b}(\mathbf{r}''')\rangle\, d\mathbf{r}'\, d\mathbf{r}''\, d\mathbf{r}'''$$

Учитывая (3.14) и (3.15) и проводя интегрирование, найдем

$$\langle R_{ik}G_{kn} * R_{nr}\rangle G_{rs} * \langle R_{su}G_{uv} * R_{vl}\rangle = -\nabla_i\nabla_l (D_K^{(2)})^2 (\langle K\rangle + {}^4/_3\mu)^{-3} \quad (3.20)$$

Аналогично вычисляются остальные слагаемые операторов $\Delta K^{(n)}$. Проводя соответствующие вычисления и учитывая выражения (3.16), (3.18) и (3.20), получим

$$\Delta K_{il}^{(n)} = \nabla_i\nabla_l \varkappa^{(n)} \quad (3.21)$$

$$\varkappa^{(2)} = \frac{D_K^{(2)}}{\langle K\rangle + {}^4/_3\mu}, \qquad \varkappa^{(n)} = \varkappa^{(2)}\xi^{n-2}, \qquad \xi \equiv \frac{(c_1 - c_2)(K_1 - K_2)}{\langle K\rangle + {}^4/_3\mu} \quad (3.22)$$

Из выражения (3.21) видно, что суммирование операторного ряда (3.11) сводится к суммированию числового ряда

$$\Delta L_{il} = \nabla_i\nabla_l \sum_2^\infty \varkappa^{(n)} = \nabla_i\nabla_l \frac{\varkappa^{(2)}}{1-\xi} \quad (3.23)$$

Представляя эффективный оператор $L_{il}{}^*$ в виде

$$L_{il}{}^* = (K^* + {}^1/_3\mu)\nabla_i\nabla_l + \mu\delta_{il}\nabla^2 \quad (3.24)$$

и учитывая выражения (3.5) и (3.23), находим эффективный модуль всестороннего сжатия K^*:

$$K^* = \langle K\rangle - \frac{D_K^{(2)}}{c_1K_2 + c_2K_1 + {}^4/_3\mu} \quad (3.25)$$

Справедливость полученных результатов ограничивается условием сходимости ряда (3.23)

$$|\xi| < 1 \quad (3.26)$$

Очевидно, последнее условие выполняется при любых концентрациях компонентов и произвольных значениях упругих модулей. В предельном случае $c_2 \to 0$ имеем $|\xi| = 1$, однако при этом $\varkappa^{(2)}$ и, следовательно, $\varkappa^{(n)} = 0$.

4. Проведенная схема расчета основывается на вычислении корреляционных добавок к среднему тензору упругих модулей $\langle\lambda_{iklm}\rangle$. Другой подход к проблеме учета корреляций состоит в нахождении корреляционных поправок к тензору упругих податливостей s_{iklm}. В основе расчета лежит уравнение несовместности

$$L_{iklm}\sigma_{lm} + \eta_{ik} = 0, \qquad L_{iklm} \equiv \varepsilon_{ipq}\varepsilon_{krs}\nabla_p\nabla_r s_{qslm} \quad (4.1)$$

Здесь σ_{lm} — тензор напряжений, η_{ik} — тензор несовместности, ε_{ipq} — единичный антисимметричный тензор.

Перенормировка оператора L_{iklm} во втором приближении проводилась в работе [6]. С помощью метода, использованного выше для перенормировки оператора L_{il}, можно найти

$$\overset{*}{s}_{iklm} = \frac{1}{9K^*}\delta_{ik}\delta_{lm} + \frac{1}{4\mu}\left(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm}\right) \quad (4.2)$$

$$\frac{1}{K^*} = \left\langle\frac{1}{K}\right\rangle - \frac{D_{1/K}^{(2)}}{c_1/K_2 + c_2/K_1 + 0.75/\mu} \quad (4.3)$$

При выводе формулы (4.3) вместо (3.26) использовалось следующее условие сходимости:

$$|\eta| < 1, \qquad \eta \equiv \frac{(c_1 - c_2)(1/K_1 - 1/K_2)}{\langle 1/K\rangle + 0.75/\mu} \tag{4.4}$$

Поскольку K^* вычислено с учетом всех корреляций, значения K^*, определяемые формулами (3.25) и (4.3), должны совпадать. В этом нетрудно убедиться, приняв во внимание, что

$$D_K^{(2)} = D_{1/K}^{(2)} K_1^2 K_2^2$$

Найденная величина K^* определяет точную связь между усредненными значениями объемных напряжений и деформаций

$$\langle\sigma_{ii}\rangle = 3K^*\langle\varepsilon_{kk}\rangle \tag{4.5}$$

Значения $\langle K\rangle$ и $\langle 1/K\rangle^{-1}$ определяют верхнюю и нижнюю границы, внутри которых должен находиться эффективный модуль. Из формул (3.25) и (4.3) видно, что это требование удовлетворяется при любых концентрациях и упругих модулях, причем модуль K^* совпадает с верхней границей $\langle K\rangle$, если $\mu \to \infty$ и совпадает с нижней границей $\langle 1/K\rangle^{-1}$ при $\mu \to 0$.

Эффективный модуль совпадает со средним арифметическим $^1/_2(\langle K\rangle + \langle 1/K\rangle^{-1})$ при условии $^4/_3\,\mu = c_1K_2 + c_2K_1$.

На основе энергетических соображений в рассматриваемом частном случае $\mu_1 = \mu_2$, Хилл рассчитал [7] истинное значение упругого модуля всестороннего сжатия

$$K = K_R\left[1 + \frac{4}{3}\frac{\mu K_V}{K_1K_2}\right]\left[1 + \frac{4}{3}\frac{\mu K_R}{K_1K_2}\right]^{-1}$$

$$K_V \equiv \langle K\rangle, \qquad K_R \equiv \langle 1/K\rangle^{-1} \tag{4.6}$$

Нетрудно видеть, что формула Хилла (4.6) совпадает со значением K^*.

Сопоставляя вариационный метод Хашина и Штрикмана [8] с развитым в настоящей работе методом, основывающимся на теории случайных функций, отметим, что в первом случае удается установить границы более узкие, чем дает непосредственное усреднение по Фойгту и Ройссу и лишь в случае $\mu_1 = \mu_2$ метод позволяет найти точное значение эффективного модуля всестороннего сжатия, совпадающее с выражением (4.6) и (3.25). Напротив, при использовании теории случайных функций принципиально возможно рассчитать точные значения эффективных модулей K и μ, если флуктуации допускают разложение типа (3.8).

Авторы выражают благодарность В. В. Болотину за обсуждение

Поступила 23 VI 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Кривоглаз М. А., Черевко А. С. Об упругих модулях смеси. Физика металлов и металловедение, 1959, т. 8, № 2.
2. Лифшиц И. М., Розенцвейг Л. Н. К теории упругих свойств поликристаллов. Ж. эксперим. и теор. физ., 1946, т. 16, № 11.
3. Татарский В. И. Распространение волн в турбулентной атмосфере. Изд-во «Наука», 1967.
4. Финкельберг В. М. Диэлектрическая проницаемость смесей. Ж. техн. физ., 1964, т. 34, № 3.
5. Даринский Б. М., Шермергор Т. Д. Температурная релаксация в поликристаллах с кубической структурой. Физика металлов и металловедение, 1964, т. 18, № 5.
6. Даринский Б. М., Шермергор Т. Д. Упругие модули поликристаллов кубической структуры. ПМТФ, 1965, № 4.
7. Hill R. Elastic properties of reinforced solids. Some theoretical principles. J. Mech. and Phys. Solids, 1963, vol. 11, No. 5.
8. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach of the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. J. Mech. and Phys. Solids, 1963, vol. 11, No. 2.